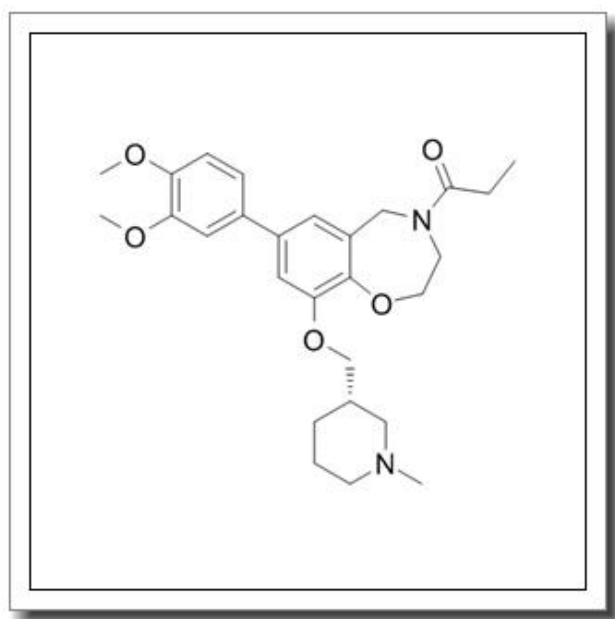


I-CBP112

1-[7-(3,4-Dimethoxyphenyl)-9-{{[(3S)-1-methyl-3-piperidinyl]methoxy}-2,3-dihydro-1,4-benzoxazepin-4(5H)-yl}]-1-propanone



产品基本信息

属性	值
化学名称	1-[7-(3,4-Dimethoxyphenyl)-9-{{[(3S)-1-methyl-3-piperidinyl]methoxy}-2,3-dihydro-1,4-benzoxazepin-4(5H)-yl}]-1-propanone
中文名称	I-CBP112
CAS 号	1640282-31-0
分子式	C27H36N2O5
分子量	468.585
纯度	≥ 96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

I-CBP112 是一种高纯度小分子化合物，化学名称为 1-[7-(3,4-二甲氧基苯基)-9-[[(3S)-1-甲基-3-哌啶基]甲氧基]-2,3-二氢-1,4-苯并氧氮杂草-4(5H)-基]-1-丙酮，分子式为 C₂₇H₃₆N₂O₅，分子量为 468.585。该化合物为白色至类白色结晶粉末，CAS 号为 1640282-31-0，纯度 ≥96%。其结构包含苯并氧氮杂草骨架和哌啶基团，具有显著的亲脂性和细胞膜穿透能力，适合体外和体内研究。

2. 生物化学功能与重要性

I-CBP112 是一种选择性溴结构域 (Bromodomain) 抑制剂，主要靶向 BRD4 蛋白的乙酰化赖氨酸结合域。通过竞争性抑制 BRD4 与组蛋白的相互作用，可调控基因转录，尤其是与炎症、肿瘤发生相关的基因表达通路。其在表观遗传学研究中具有重要价值，为癌症、免疫疾病等领域的机制探索提供了关键工具。

3. 主要应用领域与具体用途

该化合物广泛应用于基础研究和药物开发领域。在肿瘤学研究中，用于探究 BRD4 依赖性肿瘤（如白血病、实体瘤）的增殖抑制机制；在免疫学中，可用于验证炎症因子（如 IL-6、TNF- α ）的转录调控。此外，I-CBP112 还可作为先导化合物，用于优化新一代 BRD4 抑制剂的分子设计。

4. 储存条件与使用建议

建议在 -20°C 下避光干燥储存，长期保存需置于惰性气体环境中。使用时需溶解于 DMSO（浓度建议 10 mM），分装后避免反复冻融。工作浓度需根据实验体系优化，常规细胞实验范围为 0.1-10 μ M。操作时需佩戴防护手套，避免直接接触皮肤或吸入粉尘。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过 HPLC 和质谱分析验证纯度 (≥96%)，批次间提供 COA 报告。其急性毒性数据 (LD₅₀) 尚未完全明确，建议在通风橱中操作。废弃物需按危险化学品规范

处置。非药用用途，仅限科研使用。如需进一步毒理学数据，可联系供应商获取MSDS 文件。